

# РАСШИРЕНИЕ БАЗЫ ДАННЫХ РЕАКЦИЙ КОДА MONACO В ОБЛАСТИ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

А. В. Квашнина, А. И. Васюнин

*Уральский федеральный университет*

В ходе сравнения баз данных химических реакций MONACO и Р. Гэррода были выявлены значительные отличия этих двух баз. Единовременное расширение базы данных кода MONACO на основе данных Р. Гэррода не представляется возможным. Поэтому процесс осуществлялся поэтапно:

- разделение молекул  $\text{CH}_2\text{OH}$  и  $\text{CH}_3\text{O}$  и реакций для них;
- добавление гликольальдегида, формамида и этиленгликоля и реакций для них.

После расширения базы данных химических реакций были проведены тестовые расчеты сложной органической химии для условий коллапсирующей протозвезды и горячего ядра.

## MODIFICATION THE DATABASE OF CHEMICAL REACTIONS OF THE MONACO IN THE AREA OF ORGANIC MOLECULES

A. V. Kvashnina, A. I. Vasyunin

*Ural Federal University*

We compared the database of chemical reactions of MONACO and the database of R. Garrod and detected several significant differences. It proved to be impossible to perform a one-time extension of MONACO database using R. Garrod's data. So we were forced to extend the database of MONACO in the following steps:

- separate isotopes  $\text{CH}_2\text{OH}$  and  $\text{CH}_3\text{O}$  and their reactions;
- add glycolaldehyde, formamide and ethylene glycol and their reactions.

After that we performed test simulations for collapsed protostar and hot core stages.

MONACO — код, предназначенный для моделирования химической эволюции объектов межзвездной среды с учетом химических процессов в газе и на частицах пыли [1].

В коде MONACO используется база данных, которая включает более 600 молекул и реакции с ними, но она неполна в области органической химии. После расширения [2] базы данных на основе сетки

химических реакций Р. Гэррода ([http://www.astro.cornell.edu/~rgarrod/wp-content/uploads/reactions\\\_Science\\\_paper.txt](http://www.astro.cornell.edu/~rgarrod/wp-content/uploads/reactions\_Science\_paper.txt)) результаты моделирования сильно отличались от наблюдательных данных. Исходя из этого, было принято решение о поэтапном расширении базы данных химических реакций кода MONACO.

На сегодняшний день разделены изомеры  $\text{CH}_2\text{OH}$  и  $\text{CH}_3\text{O}$  (до этого в базе данных присутствовала лишь молекула  $\text{CH}_3\text{O}$ ). Кроме того, были добавлены молекулы гликольальдегида, формамида и этиленгликоля.

Суммарно база данных была расширена на четыре органические молекулы и более чем на 100 реакций с ними. На всех этапах для проверки согласования с наблюдательными данными проводилось численное моделирование для условий коллапсирующей протозвезды и стадии нагрева горячего ядра.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для молодых ученых — кандидатов наук, проект МК-8005.2016.2.

## Библиографические ссылки

1. *Vasyunin A. I., Herbst E.* Reactive Desorption and Radiative Association as Possible Drivers of Complex Molecule Formation in the Cold Interstellar Medium // *Astron. J.* — 2013. — Vol. 796. — P. 34.
2. *Квашнина А. В., Васюнин А. И.* Расширение базы данных химических реакций кода MONACO для моделирования пребиотических молекул // *Физика космоса* : тр. 46-й Международ. студ. науч. конф., Екатеринбург, 30 янв.—3 февр. 2017 г. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2017. — С. 236.